

Научно-образовательный центр Института высокомолекулярных соединений РАН  
при участии Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова и  
Санкт-Петербургского государственного университета  
**«Компьютерное моделирование наносистем в науке о материалах и биологии»**

**Однодневный семинар для студентов и аспирантов**

## ***Введение в атомистическое компьютерное моделирование биомолекулярных систем***

Место проведения: г. Санкт-Петербург, Биржевой проезд 6, ИВС РАН, комн. 152.

Время проведения: 22 апреля 2013г. (понедельник), 10.00 – 13.00 (теоретические занятия), 15.00-18.00 (практические занятия)

Организаторы: д.ф.-м.н. А.А.Гуртовенко, д.ф.-м.н. С.В.Люлин, к.ф.-м.н. С.В.Ларин.

Практические занятия будут проводиться: на базе 64-ядерного вычислительного кластера ИВС РАН (IBM System x3550 M3).

За последние несколько десятков лет компьютерное моделирование превратилось в один из основных инструментов научных исследований в биологии, биофизике и биохимии. Рост производительности суперкомпьютеров и компьютерных кластеров в совокупности с появлением реалистичных теоретических моделей высокого разрешения привели к тому, что в настоящее время компьютерное моделирование не только способно воспроизводить существующие экспериментальные данные, но и зачастую является единственным источником детальной информации для сложных биомолекулярных систем. Целью данного семинара является ознакомление студентов и аспирантов с современным состоянием в области компьютерного моделирования биомолекул. Помимо участия в теоретических занятиях, участники семинара получают практические навыки использования пакета программ GROMACS, который на сегодняшний день является одним из самых эффективных и универсальных пакетов для моделирования биомолекулярных систем.

### **Краткая программа семинара:**

- 1. Открытие семинара.** Вступительное слово руководителя Научно-образовательного центра ИВС РАН «Компьютерное моделирование наносистем в науке о материалах и биологии» д.ф.-м.н. С.В. Люлина.
- 2. Теоретические занятия**
  - Введение в методы компьютерного моделирования биомолекулярных систем.
  - Молекулярная организация белков. Особенности моделирования белков методом молекулярной динамики.
  - Компьютерное моделирование биологических мембран.
- 3. Практические занятия.**
  - Применение пакета GROMACS для моделирования биомолекулярных систем на примере белковых молекул и липидных мембран. Основные этапы моделирования методом молекулярной динамики, анализ траекторий моделирования.

**Внимание!** Количество участников ограничено: всего 15 мест. Необходима предварительная регистрация, заявки направляйте *Люлину Сергею Владимировичу*, e-mail: [s.v.lyulin@gmail.com](mailto:s.v.lyulin@gmail.com)

**Участие в семинаре – бесплатное, необходимо иметь с собой ноутбук.**